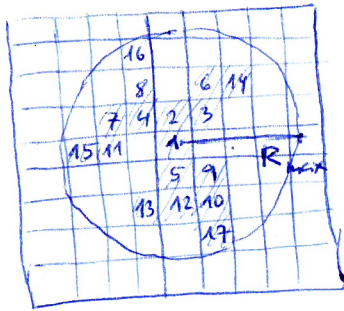


Difúze limitovaná agregace (DLA)

- příklad použití Monte-Carlo simulace ke generování komplexních struktur pomocí procesů, které se řídí jednoduchými pravidly
- evoluce (růst) systému je modelován pomocí posloupnosti náhodných stavů
- příklad ve 2D - Brownovský strom (Brownian tree) - jeho růst



- začínáme uprostřed, kde je agregační centrum a provádíme náhodné procházky částic na mřížce z určité startovací polohy, dokud se částice nedostane na políčko sousedící s již obsazeným nebo se příliš nevdálí

- přímé modelování pomocí např. difer. rovnic by bylo komplikované kvůli měnícím se okrajovým podmínkám
- pro porovnání tohoto modelu s realitou (např. elektrodepozice mědi z roztoku $CuSO_4$) je třeba určit veličiny, které mohou být změřeny i spočteny a vystihují charakter komplexní strukt. např. lze stanovit tzv. fraktální dimenzi, kterou lze odhadnout pomocí $D_f = \frac{\log N(a)}{\log L(a)}$

kde $N(a)$ je počet částic ve čtverci (krychli) o velikosti strany a (tj. počet obsazených míst mřížky) a $L(a)$ je počet míst mřížky, které tvoří tuto stranu

- pro 2D DLA vychází $D_f \approx 1,7$ a ve 3D $D_f \approx 2,5$

- obecněji je fraktální dimenze definována pomocí pokrytí stále menšími čtverci (krychlemi) o straně (hraně) ϵ

$$D_f(s) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\epsilon)}{\log \frac{1}{\epsilon}}$$

množina \mathbb{R}^n

my ovšem máme fixní velikost čtverců, ale můžeme strukturu zvětšovat a pro velký čtverec $a \times a$ bude $a = n\epsilon$, a tedy $\frac{1}{\epsilon} \sim n$

a místo limity $\epsilon \rightarrow 0$ uděláme limitu $n \rightarrow \infty$

$$D_f(s) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\log N(n)}{\log n}$$

užní počet obsazených míst mřížky ve čtverci $n \times n$

= základní algoritmus DLA

1) inicializace - nastavení „semínek“ -

- obsazení jednoho nebo i více míst mřížky, na které se budou částice zachytávat (např. agregační centrum - 1 bod, nebo jeden okraj čtverce)

2) opakuj následující kroky, dokud není struktura dostatečně velká

a) vypuštění nové částice - umístění částice se stejnou pravděpodobností na startovní pozici

(např. na kružnici o položeru $R_{start} > R_{max}$, kde R_{max} je aktuální maximální vzdálenost obsazených míst od semínka, nebo na přímku apod.)

- R_{start} se může v průběhu simulace měnit kvůli větší efektivitě, může být např. $R_{start} = R_{max} + 1$

b) difúzní pohyb částice - náhodná procházka po mřížce,

dokud není sousední místo obsazeno

(pak dojde k agregaci - viz c))

nebo není aktuální $R > R_{kill}$

(v tomto případě procházku restartujeme)

- pro větší efektivitu algoritmu lze provádět náhodnou procházku jen pro $R \leq R_{jump}$, tedy poblíž R_{start} a je-li $R > R_{jump}$, tak provádíme skoky rovnoměrně na kružnici o položeru

$R = R_{start}$ abychom neskončili uvnitř již obsazené oblasti

- R_{jump} je průběžně nastavováno, aby $R_{start} < R_{jump} < R_{kill}$

c) agregace - pokud jedno z nejbližších sousedních míst je obsazeno, ukončí se náhodnou procházku a aktuální místo obsadíme, čímž zvětšíme „hmotnost“ M struktury o jedna, pokud $M \geq M_{critová}$, simulaci ukončíme, jinak upravíme parametry R_{max} atd. a \rightarrow a)

